

# ”Lennard-Jones 配置モデル” の数式解説 (“setup\_lj.f”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは Lennard-Jones 粒子系の初期座標を構築する。格子点  $\mathbf{R}_k$  からの位置は

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{R}_k + \delta\mathbf{r}_k \quad (1)$$

で与えられ、摂動  $\delta\mathbf{r}_k$  は乱数によって付与される。相互作用ポテンシャル

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

の最小近傍に収まるよう温度スケールリングが施され、生成データが書き出される。